
科学家发现最小三维中性硼团簇

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31749.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家发现最小三维中性硼团簇。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员江凌、副研究员李刚团队联合清华大学李隽教授团队、美国布朗大学王来生教授团队，利用自主研发的基于大连相干光源的中性团簇实验站，在硼团簇的光电离效率光谱研究中发现了最小三维中性硼团簇是由9个硼原子组成，为系统研究中性硼基纳米团簇的结构演化机制提供了新思路。相关成果发表在《德国应用化学》上。

硼由于缺电子性质而具有复杂多样的化学性质，在材料、催化和能源等诸多领域都有重要应用。过去的二十年里，科研人员对带有电荷的离子型硼团簇开展了广泛的实验研究。与离子型硼团簇相比，中性硼团簇由于没有电荷，难于探测和质量选择，使得实验研究更加具有挑战性。因此，实现中性硼团簇的光谱表征是科研人员长期以来的目标之一。

为实现对中性团簇的精准探测和结构解析，江凌和李刚团队近年来自主研发了基于大连相干光源的中性团簇实验站，实现了质量选择中性团簇的高灵敏谱学探测、结构表征和反应性能研究，发现了最小水滴立体结构是由五个水分子团簇组成。这一独特的实验方法为研究各类中性团簇开辟了新途径。

本工作中，合作团队基于大连相干光源的中性团簇实验站，测定了一系列中性硼团簇的光电离效率光谱。李隽团队利用自编的TGMin程序结合高精度的量子化学理论方法，计算了硼团簇的各种稳定结构和电离势，理论与实验结果高度吻合。研究表明，B₉的最稳定结构是具有D_{7h}对称性的七角双锥构型，表明在中性B₉团簇中已经形成了三维结构。

该工作揭示了最小中性硼团簇三维结构是由9个硼原子组成，突破了科研人员长期以来对中性硼团簇的研究瓶颈，为揭示硼基纳米团簇的结构演化奥秘提供了新的可能。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202419089>

作者：江凌等 来源：《德国应用化学》

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发